



TITLE:

# 古典力学系に対する数値解法(常微分方程式系の数値解析とその周辺)

AUTHOR(S):

前田, 茂

---

CITATION:

前田, 茂. 古典力学系に対する数値解法(常微分方程式系の数値解析とその周辺). 数理解析研究所講究録 1993, 841: 1-12

ISSUE DATE:

1993-05

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/83556>

RIGHT:

## 古典力学系に対する数値解法

徳島大学工学部（非常勤） 前田 茂（Shigeru Maeda）

本報告では、古典力学に特有の性質を反映させた数値解法のいくつかを紹介する。初めに、古典力学系全般に特有な性質を概観する。

## 1. 古典力学系の概観[1].

A. Hamilton形式. 自由度がNのHamilton系とは、次の正準方程式で記述される系をいう。

$$\frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}(q, p, t), \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^i}(q, p, t) \quad (1 \leq i \leq N)$$

但し、HはHamiltonian関数。上式は、より簡潔に次のようにも書ける。

$$\frac{dx}{dt} = J \cdot \text{grad } H(x), \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I_N \\ -I_N & 0 \end{bmatrix}, \quad x \in R^{2N}$$

Newton力学から密接につながる系として、Hが次の形をしたseparable系が多く存在する。

$$H = T \text{ (運動エネルギー)} + U \text{ (ポテンシャルエネルギー)}$$

Hamilton系の数値積分に際して、往々にして考慮されるHamilton系の特徴を幾つか示す。

(1) symplectic構造と呼ばれる非退化閉2次形式 $\omega = \sum dp \wedge dq$ を保存する。いわゆる、2次の積分正準保存量を意味し、体積保存性などが派生する。

(2) Hが時間変数tを陽に含まない（つまり、保存的、ないしは自律的の）場合、エネルギーHの値が各軌道に沿って不変に保たれる。

(3) エネルギーも含めて、第1積分の全体が、Poisson括弧について閉じる。

汎用スキームを用いる際、特別の工夫なしではこれらの性質はスキームに継承されないことが普通である。これらの性質を持つように構成されたスキームは、それぞれ

(1)→Symplectic Integration Method等（以下、SIMと略称する）

体積（面積）保存性を有するものは、Volume(Area) Preserving Method

(2)→Energy Conservation Method などと呼ばれる。

B. Lagrange形式. (多くの) 古典力学系は, また変分原理

$$\delta \int_t^S L(q, \dot{q}, t) dt = 0$$

から従うEuler方程式でも記述される.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^i} \equiv \sum_j \left( \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} \ddot{q}^j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial q^j} \dot{q}^j \right) - \frac{\partial L}{\partial q^i} + \frac{\partial L}{\partial t} = 0.$$

これは2階ODEで, 必ずしも正規系になるとは限らない. Euler方程式は, Legendre変換で正準方程式と互いに移り合う. Lagrange形式についても幾つかの特徴的なスキームが工夫されている.

一般に, 1つのスキームが上述の特徴を多数継承することは困難で1つか2つの性質を持たせるために多大の工夫を要することも多い. 以下, それぞれの性質を継承したスキームの特徴的(でないかもしれませんが)なものを掲げる. 特に断わらない限り, 積分対象の力学系は保存的とし,  $t$  でステップ数,  $h$  でステップサイズを表すものとする.

## 2. Energy Conservation Method.

エネルギーを保存するよう工夫されたスキームは多様性に富んでいるが, 有名なものの1つがGreenspanによるものと思われる.

A. Greenspanの方法. 適用対象は, separableなHamilton系で, Hamiltonian

$$H(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (p_i)^2 + U(q)$$

に対し, 以下の差分方程式でスキームを構成する. 但し, 外力の近似量  $F$  は,  $U$  の形に依存して変わるし, また  $F$  の作り方如何で次数を高くすることも不可能ではない(彼のスキームには全く別の発想でエネルギー保存を実現したものも存在する).

$$\frac{q_{t+1} - q_t}{h} = \frac{p_{t+1} + p_t}{2}, \quad (\text{対角行列}), \quad \frac{p_{t+1} - p_t}{h} = F_t$$

但し,  $F_t$  は次式を  $m_t$  するように構成する.

$$F_t \cdot (q_{t+1} - q_t) = U(q_{t+1}) - U(q_t)$$

$$F_t \rightarrow -\text{grad } U \quad \text{as } h \rightarrow 0$$

例 1. 中心力系[2,3]  $U=U(r), r^2=\sum (q^i)^2$  ( $N=3$ ) ([3]は誤差解析にも触れている)

$$F_t = - \frac{U(r_{t+1}) - U(r_t)}{r_{t+1} - r_t} \cdot \frac{q_{t+1} - q_t}{r_{t+1} + r_t} \cong -U'(r) \cdot \frac{r}{r}$$

2 質点Calogero系[4]  $U(q)=(q^1 - q^2)^{-2}$  ( $N=2$ )

$$F_1 = \frac{(q_{t+1}^1 - q_{t+1}^2)^2 + (q_t^1 - q_t^2)^2}{(q_{t+1}^1 - q_{t+1}^2)^2 \cdot (q_t^1 - q_t^2)^2} \cong \frac{-2}{(q^1 - q^2)^3}$$

$$F_2 = -F_1$$

B. separableでないHamilton系に対するエネルギー保存. 文献[4]には, 多変数関数に対する特殊な差分variational difference quotient

$$\Delta_{x^1} f(x)|_y = f(y^1, x^2, \dots, x^N) - f(x^1, x^2, \dots, x^N)$$

$$\Delta_{x^2} f(x)|_y = f(y^1, y^2, \dots, x^N) - f(y^1, x^2, \dots, x^N)$$

-----

$$\Delta_{x^N} f(x)|_y = f(y^1, y^2, \dots, y^N) - f(y^1, y^2, \dots, x^N)$$

を用いてエネルギー保存を達成する2次公式が構成されている.

$$\frac{q_{t+1}^i - q_t^i}{h} = \Delta_{p_i} H(q_t, p_t), \quad \frac{p_{t+1}^i - p_t^i}{h} = -\Delta_{q^i} H(q_t, p_t)$$

その他の方法として, 以下のようなものが実用に供されている.

1. 通常の公式を予測子として用い, 修正子付加によってエネルギー保存を達成する方法 (例えば, [5]. 第1積分を複数个継承保存させることも可能).
2. differential/algebraic方程式として処理する方法 (古典力学系に触れたものとしては, 例えば, [25]).

エネルギー保存の方法はかなりまちまちで, 余り体系的な感はしないように思われる.

C. エネルギー保存の効果. Hamilton系が自由度1 (2次元) ならば解軌道は等エネルギー曲線 (の一部) であるためエネルギー保存は真の軌道曲線を数値的に再現させるが, 多自由度の系の場合軌道相の再現という意味では必ずしも有効ではない. [5]には, 第1積分の継承が数値解の形状に与える影響について次の指摘がある.

2 5 体問題の場合 エネルギー保存→軌道の形状にsensitive  
他の 9 つの第 1 積分→軌道の形状に余り影響せず

調和振動子の場合 エネルギー保存→軌道の形状にsensitiveでない

エネルギー関数はHamilton系を定めるという意味で非常に重要な第 1 積分であるが、それは方程式が正準方程式という特殊なものであるという前提があるからで、近似した差分方程式にはその前提がアプリアリには存在しないためエネルギーは他の第 1 積分と同じく 1 つの保存量であるとみなすほうが寧ろよいかもしれない。

### 3. 一般の第 1 積分の継承保存.

§ 2 でみたような特殊な工夫を行わない場合、(エネルギーを含む) 第 1 積分はどの程度継承保存されるのだろうか? Shampineによれば、変数の斉 1 次式でかける第 1 積分は自動的に継承されることが多い。Runge-kutta (以下, RK) 型公式の場合を見ることにする。

- (1) すべての RK 公式は ODE が許容する斉 1 次式の第 1 積分を継承保存する。これは LM 法でも同じ[6]。古典力学系の例でいうと, cyclic coordinate や例 1 の Calogero 系での全運動量等が該当する。
  - (2)  $M=0$  (後述) を満たす RK 公式は, ODE が許容する高々 2 次多項式の第 1 積分を継承保存する[7]。該当する RK 公式は, Gauss-Legendre 型のように限られたもの。
  - (3) いかなる RK 公式も高々 2 次多項式以外の第 1 積分は一般に継承保存しない
- (2) について,  $M=0$  を満たさない RK 公式でも特定の 2 次第 1 積分を継承保存することは有り得るし, (3) についても複雑な形をした第 1 積分が特定の  $h$  の値に対して偶然保存されることはあり得る点に注意する。

例えば, 中心力系では必ず角運動量 ( $q, p$  の斉 2 次式) が第 1 積分として許容され, 配位空間上の軌道がある平面に限定されることを保証するが, この性質を RK 公式を用いたとき数値解に継承させようとするならば, (2) で示した公式を用いることが安全である。

### 4. Lagrange 形式に関連した数値スキーム.

Euler 方程式は一般に正規形でなく, 正規形になる系はかなり限られる。変分原理の時間離散化版とみなせる離散型変分原理は実は次節の SIM と密接に関連しており, また正規形の Euler 方程式を想定した解法も散見するので簡単に数例をみることにする。

A. SIM (次節) との関連. Lagrangian  $L$  が  $\Sigma (q^i)^2 - U(q)$  という形をしている場合を考える. このとき, Euler方程式は正規形で, 対応するHamilton系はseparableである.

$$\ddot{q}^i = f^i(q), \quad f^i(q) = -\partial U(q) / \partial q^i \quad (\text{Euler方程式}); \quad \dot{q}^i = p_i, \quad \dot{p}_i = f^i(q) \quad (\text{正準方程式})$$

前者に対してはすべてのNyström型公式を適用できる. すなわち, Nyström型公式

$$\begin{array}{c|cc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \\ & \bar{b}_1 & \cdots & \bar{b}_s \end{array} \quad \text{に対して} \quad \begin{aligned} \dot{q}_{t+1} &= \dot{q}_t + h \dot{q}_t + h^2 \sum b_i k_i \\ \dot{q}_{t+1} &= \dot{q}_t + h \sum \bar{b}_i k_i \\ k_i &= f(q_t + h c_i \dot{q}_t + h^2 \sum a_{ij} k_j) \end{aligned} \quad (4.1)$$

[8]によれば, 次式のような(4.1)がSIMを与えるための必要十分条件を与えている.

$$b_i = \bar{b}_i (1 - c_i), \quad \bar{b}_i (b_j - a_{ij}) = \bar{b}_j (b_i - a_{ji})$$

全く違う観点から, 変分原理の時間離散化である離散型変分原理  $\delta \Sigma L(q_t, q_{t+1}) = 0$  に注目する. これは2階Euler差分方程式を導く.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_t^i}(\dot{q}_t, \dot{q}_{t+1}) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_t^i}(\dot{q}_{t-1}, \dot{q}_t) = 0$$

先出の  $L$  に対して, 単純に  $dq/dt \rightarrow (q_{t+1} - q_t)/h$  として置き換えたものに離散型変分原理を適用すると,  $(q_{t+1}^i - 2q_t^i + q_{t-1}^i)/h^2 = f^i(q_t)$  なる周知の差分方程式を得る. 離散Lagrangianをもっと複雑な形にすることで, 更に高次数を達成することも可能である.

実は, Euler差分方程式は, 離散型Legendre変換によってあるSIMに等価変形される[9]ことが知られており, SIMの1つの表現形式でもある. しかしながら, Euler差分方程式に立脚した数値スキームの研究は現在のところ余りないように思われる.

そのほか, separable系のEuler方程式に対して, エネルギー保存を満たすスキームの試みがあることも付記する[10].

B. その他の計算法. 適当な(直交)関数族  $P_i(t)$  ((shifted)Legendre多項式, 三角関数など)を用いて, 解  $q^i(t)$  を有限近似し,

$$q(t) \approx \sum_{i=0}^M \alpha_i P_i(t), \quad \alpha_i: \text{展開パラメータ}$$

作用積分  $I(\alpha_1, \dots, \alpha_M) = \int_t^s L(q(t), \dot{q}(t)) dt$  に対して,  $\partial I / \partial \alpha_i = 0$  によってパラメータの値を決定する方法がある. 文献[11]では, shifted Legendre多項式を用いて, 減衰振

動の軌道計算がなされている。ill-conditioned行列の出現などの問題点はあるものの、良好な数値結果が得られている。

## 5. Symplectic Integration Method (SIM).

既述の方法達は比較的個別に開発されている傾向がある一方、SIMについては特に近年大幅に研究が進められ、かなりまとまった分野といえる状況を呈している。SIMとは symplectic 構造を不変に保つ正準方程式の数値積分方法をいい、方法論的には幾つかの種類に分類される。本節では、簡単にSIMの概略について説明する。

### A. 歴史並びに方法論的分類.

[26]には、SIMの歴史的流れとして次のような文献が挙げられている。

R. DeVogelare, unpublished papers, 1956.

R.D. Ruth, IEEE Trans. Nuc. Sci., NS-30, 2669-2671, 1983. (& others by the same author)

Poincaré母関数に基く幾つかのスキームを提示したもので、引用されること多し。  
Feng Kang, J. Compt. Math., 4, 279-289.

現在中国では活発な研究がなされている。

J.M. Sanz-Serna, BIT, 28, 877-883, 1988.

RK型SIMの存在を示した初めての論文で、現在欧州を中心にRK型SIMの研究が活発になされている。

その他、計算物理学者を中心とする流れなどが存在する。

SIMの構成方法は次のように大別されると思われる。

- (1) Poincaré母関数に基くもの。
- (2) Symplectic Runge-Kutta Method
- (3) Hamiltonian vector fieldの指数写像に基くもの。
- (4) Weinstein母関数に基くもの。
- (5) その他。

以下、1段階法に的を絞って、上のそれぞれについて概観を見ることにする。写像 $(q, p) \rightarrow (Q, P)$ がsymplecticであるための必要十分条件を幾つか紹介すると、

$$(1) \quad \sum dp_i \wedge dq^i = \sum dP_i \wedge dQ^i$$

$$(2) \quad \text{Jacobi行列 } T = \partial(Q, P) / \partial(q, p) \text{ が, } T^t J T = J \text{ をみたすこと.}$$

(3) Poisson括弧 $\{, \}$ に関して、 $\{Q^i, P_j\} = \delta_{ij}$ ,  $\{Q^i, Q^j\} = \{P_i, P_j\} = 0$ が成立すること。他にも、Lagrange括弧を用いた条件等も知られている。これらを満たし、かつ任意の正準方程式とconsistencyを持つように、関数 $Q(q, p)$ ,  $P(q, p)$ を構成することは困難であるという事情があるため、任意のHamilton系に適用可能な実用的SIMは陰的になり陽的公式のSIMは適用対象に限定がある（例えば、separable系だけ）という傾向がある。

B. Poincare母関数に基づくSIM. 正準変換理論でつとに有名な、symplectic写像が1つの関数を用いることで次のどれにでも表現できることを用いたアルゴリズム。

$$(1) \quad p = \frac{\partial W_1}{\partial q}, \quad P = -\frac{\partial W_1}{\partial Q}, \quad W_1 = W_1(q, Q, t)$$

$$(2) \quad p = \frac{\partial W_2}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial W_2}{\partial P}, \quad W_2 = W_2(q, P, t)$$

$$(3) \quad q = -\frac{\partial W_3}{\partial p}, \quad P = -\frac{\partial W_3}{\partial Q}, \quad W_3 = W_3(p, Q, t)$$

$$(4) \quad q = -\frac{\partial W_4}{\partial p}, \quad Q = \frac{\partial W_4}{\partial P}, \quad W_4 = W_4(p, P, t)$$

[26]には、汎用的かつ高次数の公式を導いているが、非常に煩雑な差分方程式である。

例2. [16]における用例（Ruthの結果を含む）。

separable系  $dq/dt=P(p)$ ,  $dp/dt=f(q)$ ; Hamiltonianは $H(q, p)=T(p)+U(q)$  ( $T$ は $p$ の2次式) 第2のタイプの母関数として  $W_{2,i}(q_{i-1}, p_i)=q_{i-1}p_i+[a_i T(p_i)+b_i U(q_{i-1})]$  ( $i \geq 1$ ) を累次使用し、1ステップを進める $(q_0, p_0) \rightarrow (q_n, p_n)$ 計算を次式で実現する。

$$p_i = p_{i-1} + b_i f(q_{i-1})h, \quad q_i = q_{i-1} + a_i P(p_i)h \quad (i=1, \dots, n)$$

$n$ が4以下のとき、パラメータ $a_i, b_i$ を適当に選ぶことで $n$ 次公式が実現できる。



$$\begin{aligned}
n=1 & \quad (a_1, b_1) = (1, 1) \\
n=2 & \quad (a_1, a_2, b_1, b_2) = (1/2, 1/2, 0, 1) \quad \text{leapfrog} \\
& \quad (a_1, a_2, b_1, b_2) = (1, 0, 1/2, 1/2) \quad \text{pseudo leapfrog} \\
n=3 & \quad (a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3) = (2/3, -2/3, 1, 7/24, 3/4, -1/24) \quad (\text{Ruth}) \\
n=4 & \quad a_1=a_4=(2+2^{1/3}+2^{-1/3})/6, \quad a_2=a_3=(2-2^{1/3}-2^{-1/3})/6, \\
& \quad b_1=0, \quad b_2=b_4=1/(2-2^{1/3}), \quad b_3=1/(1-2^{2/3})
\end{aligned}$$

パラメータの決定には自由度があるので、他の値も可能。

C. Symplectic Integration Method. RK 公式を Butcher array  $\begin{array}{c|c} c_i & a_{ij} \\ \hline & b_j \end{array}$  で表現する。行列  $M=(m_{ij})$  を  $m_{ij}=b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j$  で定義する。  $M=O$  ならば、任意の Hamilton 系に適用して得られる写像は symplectic となる[15]。該当する RK 公式の詳細な分類が[17]等になされているが、Gauss-Legendre 型公式などが代表的である。  $M=O$  に加えて、重みがすべて正ならば、公式は代数的安定であり、更に以下のような性質が成り立つ。

A 安定性に関して（線形系が対象）。安定性関数(stability function)  $R(z)$  が複素平面の各領域で下記の性質を持つため、右方にかいた性質が従う。

左半平面上で  $|R(z)| < 1 \rightarrow A$  安定

虚軸上で  $|R(z)| = 1 \rightarrow$  楕円閉軌道の正確な再現

右半平面上で  $|R(z)| > 1 \rightarrow$  異常収束の不存在

B 安定性に関して（線形系、非線形系を問わず）。

互いに近接していく 2 軌道の近接性の再現  $\rightarrow B$  安定

互いに離れていく 2 軌道の発散性の再現

積分対象を線形系に限定し、線形 Hamilton 系に対してスキームが線形 symplectic 写像を与えるための必要十分条件を求めると、  $M=O$  より弱い  $R(z)R(-z)=1$  である[14]。  $M=O$  を満たす公式は勿論のこと他に対称 RK 公式[18]なども後者の条件を満たす。この条件だけでも重み正という付加条件下で、上の「A 安定性に関して」で記した性質が成り立つ[19]。

Symplectic RK 公式の Poincare 母関数も既に求められている。文献[20]によれば

$$K(q_t, p_{t+1}) = p_t \cdot q_{t+1} - h \sum b_i H(q_i, p_i) - h^2 \sum b_i a_{ij} H_p(q_i, p_i) \cdot H_q(q_j, p_j)$$

が母関数であることが示されている。また、  $d^2q/dt^2=f(q)$  に symplectic RKN 法を適用した際の母関数は

$K(q_t, p_{t+1}) = p_t \cdot q_{t+1} - h \sum b_i U(q_i) - h^2 p_t \cdot p_t / 2 + h^3 \sum b_i (b_i - a_i) f(q_i) \cdot f(q_i) / 2$   
 であること導出されている[21].

D. Hamiltonian vector field の指数写像に基く S I M. separable系に適用することが多い. 任意関数  $I(q, p)$  に対して,

$$X_I = \sum_i \left( \frac{\partial I}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial I}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right)$$

を ( $I$  を母関数とする) Hamiltonian vector field といい, そのフロー  $\exp(hX_I)$  は symplectic 写像を与える.

Hamiltonian  $H(q, p) = T(p) + U(q)$  を持つ系の真の解は  $\exp(hX_H)$  であるが, これに対し適当なパラメータ  $c_i, d_i$  を含む  $\exp(c_i hX_T), \exp(d_i hX_U)$  を組み合わせることで必要な次数を達成する方法である. 代表的な用例として, 文献[22, 23]を挙げる.

例 3.  $T(p) = \sum (p_i)^2 / 2$  に対しては  $\exp(hX_T): (q, p) \rightarrow (q + hp, p)$

$U = U(q)$  に対しては  $\exp(hX_U): (q, p) \rightarrow (q, p + hf(q))$

それぞれのフローは簡潔な写像となっていることに注意. また, ある関数  $g$  が Poisson 括弧について  $T, U$  の双方と可換, つまり,  $\{g, T\} = \{g, U\} = 0$  ならば,  $g$  は差分方程式の保存量であり, また  $\{g, H\} = 0$  が従うためもとの Hamilton 系の第 1 積分でもある.

E. Weinstein 母関数に基く S I M. Weinstein は, 任意関数  $S(x)$  を用いて以下のように構成される写像  $x_t \rightarrow x_{t+1}$  が symplectic になることを示した[24].

$$x_{t+1} = x + (h/2)J \cdot \text{grad} S(x), \quad x_t = x - (h/2)J \cdot \text{grad} S(x), \quad x: \text{中間値}$$

このとき, 関数  $(h/2)S$  のことを Weinstein 母関数とよぶ.

Hamilton 系  $dx/dt = J \cdot \text{grad} H(x)$  の積分に上のアルゴリズムを用い,  $S$  として  $H$  をそのまま使うことにするならば, これは, 「前進 Euler 公式  $\circ$  Euler 後退公式 = 陰的中点公式」を与えている. すなわち, RK 型公式の 1 つを与える.

$S$  として斉 2 次式の場合, 上のアルゴリズムは Cayley 変換された行列を係数行列とする線形 S I M を与える (文献[14]において Padé 近似に関連して詳しく考察されている). そういう意味で, 本アルゴリズムはある種の線形 S I M の (RK 型 S I M に関連する) 1 つの非線形化とみなせるといえる.

F. SIMの効用とは？ 以上幾つかのタイプのSIMを概観してきたが、一般にはどのようなmerit(demerit)があるのだろうか。それぞれのタイプに特有なものは除いて、概論的な特徴を数項挙げると、

- (1) Hamilton系のHamilton摂動系による数値積分。

完全に証明されている訳ではないようだが、計算誤差を考慮しない限り ( $h$ が十分小さいとき) 数値解はあるHamilton摂動系の軌道を描くと考えられている。

- (2) 体積保存性、あるいは、保存量が対称性 (差分方程式を不変にするLie群) を生成する[9]などの性質の保持。前者は、ある種のnumerical dissipationを防止することがある。

- (3) 実用的SIMは、概して、長時間走行や、軌道相全般の数値計算に適するという指摘がある[26]。RK型SIMを例にみると、symplectic条件 $M=0$ の外に、重み正という条件が是非必要のようである (後者は、実際に使われるRK型公式では大概満足されている)。このとき、§5, Cで述べたような、収束性のみならず発散性も併せて数値的によく再現される。実際、そのことが本項目の特徴につながるようである。しかしながら、陰的公式であるがゆえの計算時間の増加や、高次数Gauss-Legendre公式ではパラメータの値が数値的にしか与えられないことによる誤差への影響などマイナス面も併せ持つ。

- (4) symplectic geometryの成果が数値解に反映できる。

Kepler運動を例に取ろう。自由度3の中心力系で、Hamiltonianは  $H = \sum (p_i)^2 / 2 - 1/r$  である。配位空間上の軌道は、楕円曲線である。

真の力学系は、以下の3種類の第1積分を許容する。(1)エネルギー、(2)角運動量  $L = p \times q$ , (3)離心ベクトル。この内、(2)だけが2次多項式であるため、差分スキームが継承保存するのは(2)だけである可能性が強い。そこでなんらかのSIMによって数値積分を行い、角運動量の保存が継承された状況を考える。このとき、数値解に関して、以下のことがいえるのである。

- (a) 平面運動の保証。 ( $q \times L = 0$ によるので、この性質はsymplecticityとは無関係である)  
 (b) 任意の回転行列 $T$ に対して、差分方程式は $(q, p) \rightarrow (Tq, Tp)$ という変換に対して不変、換言すれば、1つの数値解に $(q_t, p_t)$ 対して、 $(Tq_t, Tp_t)$ もまた数値解となり、ある種の数値解どうしの合同性が保証される[9, 27]。  
 (c) 完全可積分性[1, 28]が離散化の過程で保持される可能性が強く、 $h$ が十分小さければ、

数値解の形状は楕円が徐々に回転していくようになるか、または、閉軌道になる。これに対し、例えば、 $1/6, 1/8$ 公式を用いたときは、楕円が徐々に中へ巻き込むか、あるいは外方へ広がるという様子を示しがちである。もちろん、どちらがいかという優劣は他の要因を併せて論じるべきものであるが、傾向を示すものとして興味深いと思われる。

SIMには、まだまだ古典力学系固有の諸種の性質を取り入れて発展する可能性が残されており、興味深い研究対象であろうと思われる。最後に、SIMの現状に関して好個のoverviewを与えるものとして、文献[29]を挙げる。特にsymplectic RK公式に関して、分類、母関数などが詳しく解説されている。

古典力学系に対する数値解法というタイトルにも拘らず、内容がかなり報告者の興味に偏ったこと、並びに、各トピックに関連した文献は非常に多数にのぼると思われるので特徴的なもののみに限ったこととお断りいたします。

#### References

- [1] V.I.Arnold, Mathematical methods of classical mechanics (Engl. Trans.), Springer, 1978.
- [2] D.G.Greenspan, Arithmetic applied mathematics, Pergamon, 1980.
- [3] R.A.Labudde and D.G.Greenspan, J. Compt. Phys. 15, 134-167, 1974.
- [4] D.G.Greenspan, Comput. Math. Appl. 19, 91-95, 1990.
- [5] P.E.Nacozy, Space Sci. 14, 40-50, 1988.
- [6] J.S.Rosenbaum, J. Compt. Phys. 20, 259-267, 1976.
- [7] G.J.Cooper, IMA J. Numer. Anal. 7, 1-13, 1987.
- [8] M.P.Calvo and J.M.Sanz-Senra, BIT 32, 131-142, 1992.
- [9] S.Maeda, Math. Japon. 25, 405-420, 1980.

- [10] L.Gotusso, Appl. Math. Compt. 17, 129-136, 1985.
- [11] D.L.Hitzl, J. Compt. Phys. 38, 185-211, 1980.
- [12] R.D.Ruth, IEEE Trans. Nuc. Sci. NS-30, 2669-2671, 1983.
- [13] Feng Kang, J. Compt. Math. 4, 279-289, 1986.
- [14] Feng Kang, Proc. 1984 Beijing Symp. on Diff. Geom. and DEs, Compt of PDEs, Ed. Feng Kang, Science Press, 42-58, 1985.
- [15] J.M.Sanz-Serna, BIT 28, 877-883, 1988.
- [16] J.Candy and W.Rozmus, J. Compt. Phys. 92, 230-256, 1991.
- [17] S.Saitoh, H.Sugiura, and T.Mitsui, BIT 32, 345-349, & 539-543, 1992.
- [18] H.J.Stetter, Analysis of discretization methods for ODEs, Springer, 1973.
- [19] S.Maeda, Trans. IEICE J73-A, 1648-1653, 1990 (in Japanese). (Engl. Trans., Electronics and Communications in Japan Part 3, 74, 98-104, 1991.
- [20] F.Lasagni, unpublished manuscript.
- [21] M.P.Calvo and J.M.Sanz-Serna, Appl. Math. Compt. Report, Report 1991/1, Univ. de Valladolid.
- [22] H.Yoshida, Phys. Lett. A 150, 262-268, 1991.
- [23] M.Suzuki, J. Math. Phys. 32, 400-407, 1991.
- [24] A.Weinstein, Adv. in Math. 6, 329-346, 1971.
- [25] C.W.Gear, Lec. Note Math. 1386, 54-68.
- [26] P.J.Channel and C.Scovel, Nonlinearity 3, 231-259, 1990.
- [27] S.Maeda, Trans. IEICE J73-A, 544-549, 1990 (in Japanese). (Engl. Trans., Electronics and Communications in Japan Part 3, 73, 107-113, 1990.
- [28] S.Maeda, Proc. Japan. Acad. 63A, 198-200, 1987.
- [29] J.M.Sanz-Serna, Symplectic Integrators for Hamiltonian problems : an overview, Acta Numerica, 243-286, 1991.